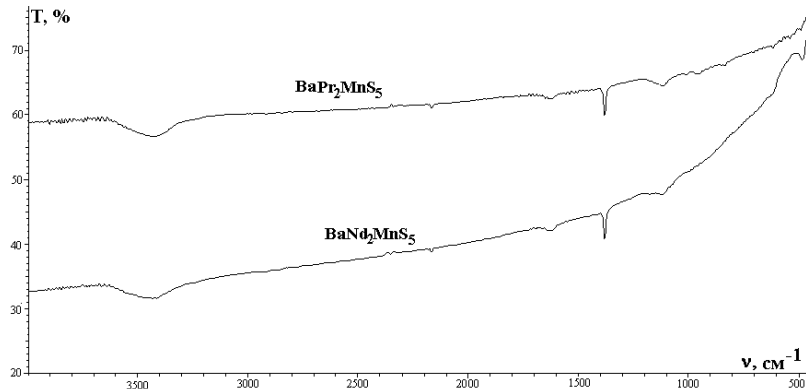


ной гигроскопичности поверхности дисперсных порошков сложных сульфидов.



ИК-Фурье спектры соединений  $\text{BaLn}_2\text{MnS}_5$  ( $\text{Ln} = \text{Pr}, \text{Nd}$ ), отожженных при 1270 К, 2250 ч

Съёмку проводили на ИК-Фурье-спектрометре «ФСМ 1201» в ЦКП «Химический анализ и идентификация веществ» Тюменского государственного университета. Авторы выражают благодарность к.х.н., ст. научному сотруднику кафедры органической и экологической химии ТюмГУ Волковой С.С.

1. Якубин А.А., Мони́на Л.Н. ИК-Фурье спектры соединений  $\text{BaLn}_2\text{MnS}_5$  ( $\text{Ln} = \text{La}, \text{Ce}$ ) // Пробл. теорет. и эксперимент. химии : тез. докл. XXVI Рос. молодеж. науч. конф. Екатеринбург : Изд-во Урал. ун-та, 2016. С. 333–334.

## ВЫЧИСЛЕНИЕ СТРУКТУРНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ЦЕОЛИТА НАХЧЫВАНА

*Мамедова Г.А.*

Институт природных ресурсов НАН Азербайджана  
7000, г. Нахчыван, пр. Г. Алиева, д. 76

Наряду с химическим и минеральным составами природных цеолитов, текстурные и структурные характеристики являются основополагающими при изучении и разработке сорбентов, участвующих в различных адсорбционных процессах. Адсорбенты-цеолиты должны обладать развитой удельной поверхностью, иметь большой адсорбционный объем пор и раскрытую пористость.

При рассмотрении химических и каталитических свойств цеолитов часто достаточно феноменологического описания, однако по настоящему понять эти явления можно, только детально изучив кристаллическую структуру цеолитов. Сообщаемость между полостями и каналами, размер, форма, расположение полостей и свободный объем пор, описывает тип каркаса, что играет важную роль в определении специфических свойств конкретного цеолита.

В состав исследуемого образца входит морденит, кварц и в малых количествах анортит. Исследуемый нами образец природного цеолита Нахчывана характеризуется следующим химическим составом:  $\text{SiO}_2$  - 65,70%,  $\text{Al}_2\text{O}_3$  - 15,89%,  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  - 1,30%,  $\text{CaO}$  - 5,08%,  $\text{MgO}$  - 0,50%,  $\text{TiO}_2$  - 0,05%,  $\text{MnO}$  - 0,07%,  $\text{K}_2\text{O}$  - 3,8%,  $\text{Na}_2\text{O}$  - 1,1%,  $\text{P}_2\text{O}_5$  - 0,08%,  $\text{H}_2\text{O}$  - 7,5%;  $\Sigma$  101,07. По результатам химического состава, определенного рентгенографическим методом анализа, рассчитаны параметры пористой структуры природного цеолита Нахчывана. Методика расчета параметров структуры цеолитов основана на отношении числа молекул воды  $m$  к числу кремнеалюмокислородных тетраэдров  $n$  по формуле:  $(m/(n+2))$  и соотношения объемов, занимаемых водой  $V_{\text{H}_2\text{O}}$  ( $V_{\text{H}_2\text{O}} = 18 \text{ см}^3/\text{моль}$ ) и тетраэдрами ( $V_t = 24 \text{ см}^3/\text{моль}$ ,  $M_t = 60$ ). На основе химического состава цеолита были рассчитаны объем пор, свободный объем пор (без воды и катионов), плотность каркаса цеолита (без воды и катионов), плотность гидратированного цеолита, плотность дегидратированного цеолита, число тетраэдров в  $1 \text{ см}^3$  цеолита, концентрация обменных катионов, концентрация ионов кислорода, энергия активации самодиффузии воды.

Для характеристики свойств цеолита введена величина «плотность каркаса» - FD, выражаемая числом Т-атомов (Т-атомы это атомы кремния и алюминия). Плотность каркаса – это число Т-атомов (Si, Al) приходящих на  $1000 \text{ \AA}^3$ . Этот параметр широко применяется и для минералов со смешанными каркасами, где наряду с Т-атомами в расчет включаются также пяти-, шестикоординированные Mn, Zr, Ti, Nb и т.д. Но величина «плотность каркаса» не связана напрямую с «плотностью» структуры цеолита в целом. Новый параметр  $V_{\text{fr}} (\text{\AA}^3)$  – «нормализованный объем каркаса» - получается делением объема элементарной ячейки на число кремния, алюминия и кислорода в ней. И от  $V_{\text{fr}}$  остается один шаг до параметра  $V_N (\text{\AA}^3)$  – «нормализованный» объем соединения. Он вычисляется как эффективный объем «среднего атома», то есть делением объема элементарной ячейки на число N всех атомов в ней. Вычисленные значения этих величин хорошо соответствуют с литературными данными природного морденита.